

14

①9 BUNDESREPUBLIK  
DEUTSCHLAND



DEUTSCHES  
PATENTAMT

⑫ **Offenlegungsschrift**  
⑪ **DE 37 17 480 A1**

⑳ Aktenzeichen: P 37 17 480.0  
㉑ Anmeldetag: 23. 5. 87  
㉒ Offenlegungstag: 1. 12. 88

⑤1 Int. Cl. 4:

**C 07 D 239/48**

A 01 N 43/54  
A 01 N 47/20  
C 07 D 405/12  
C 07 D 403/12  
C 07 D 401/12  
C 07 D 409/12  
C 07 D 401/14  
C 07 D 403/14  
C 07 D 405/14  
C 07 D 409/14  
// (C07D 239/48,  
207:06,207:32,211:14,  
213:36,307:14,307:52,  
333:20,263:56)

DE 37 17 480 A1

⑦1 Anmelder:

Shell Agrar GmbH & Co KG, 6507 Ingelheim, DE

⑦4 Vertreter:

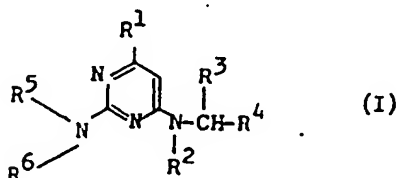
Jung, E., Dipl.-Chem. Dr.phil.; Schirdewahn, J.,  
Dipl.-Phys. Dr.rer.nat.; Gernhardt, C., Dipl.-Ing.,  
Pat.-Anwälte, 8000 München

⑦2 Erfinder:

Mengel, Rudolf, Dipl.-Chem. Dr., 6535  
Gau-Algesheim, DE; Schröder, Ludwig, Dipl.-Chem.  
Dr., 6507 Ingelheim, DE; Stransky, Werner,  
Dipl.-Chem. Dr., 6535 Gau-Algesheim, DE; Linden,  
Gerbert, Dipl.-Landw. Dr., 6507 Ingelheim, DE;  
Schneider, Gerhart, Dipl.-Biol., 6109 Mühlthal, DE

⑤4 Neue herbizid und mikrobizid wirksame 2,6-Diaminopyrimidine

Es werden herbizid und mikrobizid wirksame 2,6-Diamino-  
pyrimidine der Formel



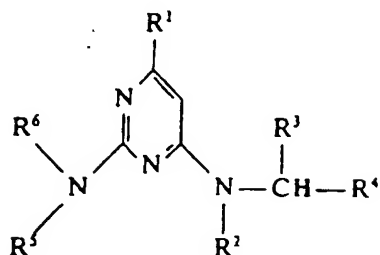
in der R<sup>1</sup> bis R<sup>6</sup> die im Text genannten Bedeutungen haben,  
sowie ein Verfahren zur Synthese dieser Verbindungen be-  
schrieben.

E 37 17 480 A1

## 1. Verbindungen der Formel

5

10



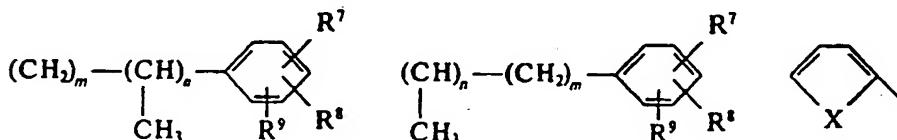
15

sowie deren Salze mit Säuren und Metallkomplexe in der

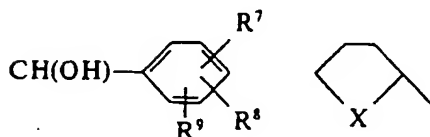
20

- $R^1$  Halogen, Niederalkyl, Halogenniederalkyl, Niederalkyloxy, Halogenniederalkyloxy,  
 $R^2$  Wasserstoff, Niederalkyl,  
 $R^3$  Wasserstoff, Niederalkyl, phenylsubstituiertes Niederalkyl, gegebenenfalls substituiertes Phenyl,

25



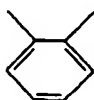
30



35

- $m$  0, 1, 2, 3  
 $n$  0, 1,  
 $X$  S, NH, NCH<sub>3</sub>, C=N,

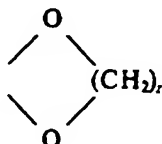
40



45

- $R^3$  und  $R^4$   $CH_2, CH_2CH_2, O,$   
 $R^5$  gemeinsam  $-CH_2-CH(C_6H_5)-$ ,  
 $R^6$  Wasserstoff, gegebenenfalls halogensubstituiertes Alkyl mit bis zu 15 C-Atomen, ggf. subs.  
 $R^5$  und  $R^6$  Cyclopropyl, Alkenyl mit bis zu 4 C-Atomen  
 $R^6$  Wasserstoff, Niederalkyl,  $-COR^3$   
 $R^5$  und  $R^6$  gemeinsam eine gegebenenfalls ein- oder mehrfach niederalkylsubstituierte  $-(CH_2)_p-$  Gruppe mit  $p = 4$  oder  $5$ ,  
 $R^7$  Wasserstoff, Halogen, Niederalkyl, Niederalkyloxy, Halogenniederalkyl, Halogenniederalkyloxy, Hydroxy, Mercapto, Cyano, Niederalkylthio, Halogenniederalkylthio, gegebenenfalls substituiertes Phenyl, gegebenenfalls substituiertes Phenoxy, gegebenenfalls substituiertes Benzyl, Di-niederalkylamino,  $NO_2$ ,  $SO_2NR^2R^3$ ,  $CH_3SO_2$ , Di-niederalkylaminocarbonyloxy  
 $R^8$  und  $R^9$  die gleich oder verschieden sein können, Wasserstoff, Halogen, Niederalkyl, Niederalkyloxy, Halogenniederalkyl, Halogenniederalkyloxy,  
 $R^8$  und  $R^9$  gemeinsam

60



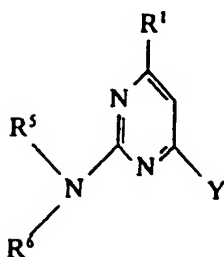
65

mit  $z = 1, 2$ .

$R^5$  nicht für Wasserstoff oder Ethyl steht, wenn  
 $R^1$  Chlor  
 $R^2, R^3, R^6$  Wasserstoff und  
 $R^4$  unsubstituiertes Phenyl

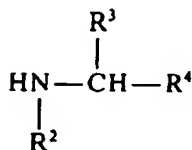
bedeutet.

2. Herbizides Mittel, dadurch gekennzeichnet, daß es als Wirkstoff mindestens ein Pyrimidinderivat der Formel I, Anspruch 1 enthält.
3. Mikrobizides Mittel, dadurch gekennzeichnet, daß es als Wirkstoff mindestens eine Verbindung der Formel I, Anspruch 1 enthält.
4. Verwendung von Verbindungen nach Anspruch 1 bei der Bekämpfung unerwünschten Pflanzenwachstums.
5. Verwendung von Verbindungen nach Anspruch 1 bei der Verhütung und Bekämpfung von Mikroorganismenbefall auf Kulturpflanzen.
6. Verfahren zur Herstellung von Verbindungen der Formel I, dadurch gekennzeichnet, daß ein Pyrimidin der Formel



(II)

worin  $R^1$ ,  $R^5$  und  $R^6$  die obigen Bedeutungen haben und Y für eine nucleophil austauschbare Gruppe steht, mit einem Amin der Formel



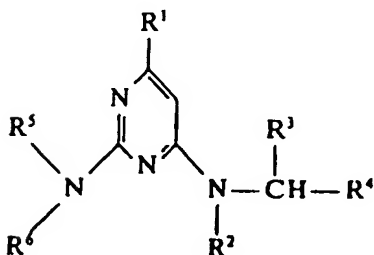
(III)

in der  $R^2$ ,  $R^3$  und  $R^4$  die obigen Bedeutungen haben, nach an sich bekannten Verfahren umsetzt.

### Beschreibung

Die Erfindung betrifft neue Pyrimidinderivate, ihre Herstellung, herbizide und mikrobizide Mittel, die diese Pyrimidine enthalten sowie ihre Verwendung bei der Bekämpfung unerwünschten Pflanzenwachstums und bei der Verhütung und Bekämpfung von Mikroorganismenbefall auf Kulturpflanzen.

Es wurde gefunden, daß die neuen 2,6-Diaminopyrimidine der Formel

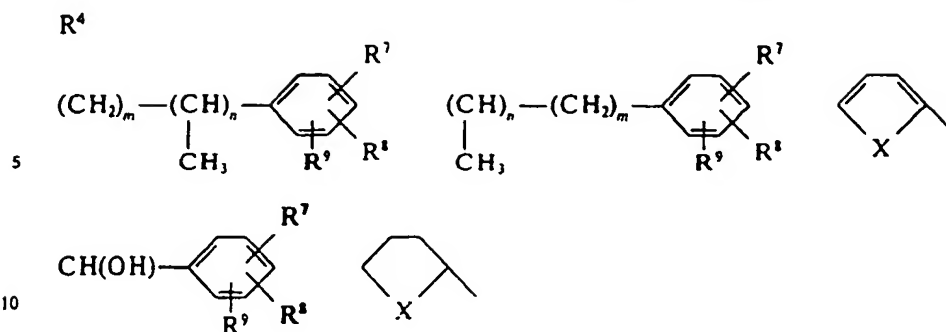


(I)

sowie deren Salze mit Säuren und deren Metallkomplexe, gegen zahlreiche Unkräuter und Ungräser stark wirksam sind.

In der obigen Formel und im folgenden bedeutet

$R^1$  Halogen, Niederalkyl, Halogenniederalkyl, Niederalkyloxy, Halogenniederalkyloxy,  
 $R^2$  Wasserstoff, Niederalkyl,  
 $R^3$  Wasserstoff, Niederalkyl, phenylsubstituiertes Niederalkyl, gegebenenfalls substituiertes Phenyl,



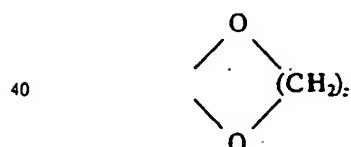
15

$m$  0, 1, 2, 3  
 $n$  0, 1,  
 $X$  S, NH, NCH<sub>3</sub>, C=N,



25

$R^3$  und  $R^4$   $CH_2, CH_2-CH_2, O$   
 $R^5$  gemeinsam  $-CH_2-CH(C_6H_5)-$ ,  
Wasserstoff, gegebenenfalls halogensubstituiertes Alkyl mit bis zu 15 C-Atomen, ggf. subs. Cyclopropyl, Alkenyl mit bis zu 4 C-Atomen  
 $R^6$  Wasserstoff, Niederalkyl,  $-COR^3$   
 $R^5$  und  $R^6$  gemeinsam eine gegebenenfalls ein- oder mehrfach niederalkylsubstituierte  $-(CH_2)_p-$  Gruppe mit  $p = 4$  oder  $5$ ,  
 $R^7$  Wasserstoff, Halogen, Niederalkyl, Niederalkyloxy, Halogenniederalkyl, Halogenniederalkyloxy, Hydroxy, Mercapto, Cyano, Niederalkylthio, Halogenniederalkylthio, gegebenenfalls substituiertes Phenyl, gegebenenfalls substituiertes Phenoxy, gegebenenfalls substituiertes Benzyl, Di-niederalkylamino,  $NO_2$ ,  $SO_2NR^2R^3$ ,  $CH_3SO_2$ , Di-niederalkylaminocarbonyloxy  
30  $R^8$  und  $R^9$  die gleich oder verschieden sein können, Wasserstoff, Halogen, Niederalkyl, Niederalkyloxy, Halogenniederalkyl, Halogenniederalkyloxy,  
35  $R^8$  und  $R^9$  gemeinsam



mit  $z = 1, 2$

45 mit der Einschränkung, daß

50  $R^5$  nicht für Wasserstoff oder Ethyl steht, wenn  
 $R^1$  für Chlor  
 $R^2, R^3, R^6$  für Wasserstoff und  
 $R^4$  für unsubstituiertes Phenyl

steht.

55 Niederalkyl ist im Rahmen der obigen Definition bevorzugt eine geradkettige oder verzweigte Gruppe dieser Art mit bis zu 4 Kohlenstoffatomen, also Methyl, Ethyl, n-Propyl, Isopropyl, n-Butyl, sek-Butyl, iso-Butyl und tert-Butyl. Dies gilt auch, soweit der Niederalkylrest Bestandteil einer Alkoxy- oder Alkylthiogruppe ist. Hervorzuheben sind Methyl, Methoxy und Methylthio.

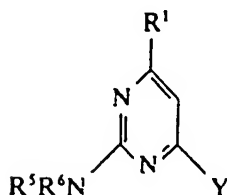
60 Alkylgruppen umfassen Niederalkylreste nach vorstehender Definition oder aber geradkettige oder verzweigte Kohlenstoffketten mit bis zu 15 Kohlenstoffatomen. Bevorzugte Gruppen sind Neopentyl-, Hexyl und Dodecyl. Die Alkylgruppen können gegebenenfalls mit bis zu 10 Halogenatomen substituiert sein.

Unter Halogen sind Fluor, Chlor, Brom und Jod zu verstehen, vor allem Fluor, Chlor und in zweiter Linie Brom.

65 Mit Halogenniederalkyl, Halogenniederalkoxy und Halogenniederalkylthioesten sind Gruppen gemeint, deren Niederalkylteil wie zuvor definiert ist und mit 1 bis 6 Halogenatomen, die gleich oder verschieden sein können, substituiert ist.

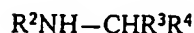
Bevorzugt sind die Trifluormethyl-, Trichlormethyl-, Difluormethyl-, Dichlormethyl-, Fluormethyl-, Chlormethyl-, Brommethyl-, 2,2,2-Trifluoethyl-, 2,2,2-Trichlorethyl, Monochlordifluormethyl- und Dichlormonofluormethyl-

Alkenylgruppen sind die Vinyl, Allyl und die verschiedenen isomeren Butenylradikale.  
Die neuen Verbindungen werden nach an sich bekannten Verfahren hergestellt, indem man ein Pyrimidin der Formel



(II)

worin R¹, R⁵ und R⁶ die obigen Bedeutungen haben und Y für eine nucleophil austauschbare Gruppe, wie Halogen, vorzugsweise aber Chlor und Brom steht, mit einem Amin der Formel

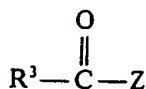


(III)

in der R², R³ und R⁴ die obigen Bedeutungen haben, umgesetzt.

Die Umsetzung erfolgt zweckmäßig in einem unter den Reaktionsbedingungen inerten Lösungsmittel bei Siedetemperatur, wobei es vorteilhaft ist, eine organische oder anorganische Base als säurebindendes Mittel zuzusetzen, bevorzugt ist Triethylamin. Das Pyrimidin (II) und das Amin (III) können in äquimolaren Mengen eingesetzt werden. Zur Verkürzung der Reaktionszeit wird bevorzugt ein Überschuß an Amin (III) verwendet.

Verbindungen der Formel I, in denen R⁶ für die Gruppe COR³ steht können zweckmäßigerweise auch durch an sich bekannte Umsetzung von Verbindungen der Formel I, in denen R⁶ für Wasserstoff steht mit reaktiven Carbonsäurederivaten der Formel



(IV)

in denen Z für eine nucleophil austauschbare Gruppe, wie z. B. Halogen, R³-COO- oder gemischte Anhydride steht, erhalten werden.

Die als Ausgangsprodukte verwendeten Pyrimidinderivate der Formel (II) und die Amine der Formel (III) sind literaturbekannt oder können nach analogen Verfahren hergestellt werden.

Die Verbindungen der Formel I sind herbizid und mikrobizid wirksam.

Mann kann sie vor und insbesondere nach dem Auflaufen gegen zahlreiche Unkräuter und Ungräser einsetzen. Zu nennen sind hier besonders:

Amaranthus retroflexus	Sida spinosa	40
Abutilon theophrasti	Sinapis arvensis	
Bidens pilosa	Stellaria medica	
Cassia tora	Veronica persicaria	
Centaurea cyanus	Veronica hederacefolia	45
Datura stramonium	Xanthium pensylvanicum	
Desmodium tortuosum	Alopecurus myosuroides	
Galium aparine	Avena fatua	
Ipomoea purpurea	Achinochloa crus-galli	
Ipomoea hederacea	Echinochloa colonum	50
Ipomoea aconitifolia	Eleusine indica	
Lamium purpurea	Digitaria sanguinalis	
Lamium amplexicaule	Cynodon dactylon	
Lapsana communis	Leptochloa filiformis	
Portulaca oleracea	Sorghum halepense	55
	Setaria viridis	

Neben der bei hohen Konzentrationen möglichen Anwendung als Totalherbizid erlaubt die gute Selektivität bei niedrigen Konzentrationen die Unkraut- bzw. Ungrasbekämpfung in zahlreichen Kulturen; beispielsweise in Weizen, Gerste und anderen Getreidearten, in Mais, Sorghum, Reis, Zuckerrohr, Soja, Baumwolle, Zuckerrübe, Kartoffel, Raps u. a.

Für die Anwendung werden die Verbindungen der Formel I in an sich bekannter Weise mit üblichen Hilfs- und oder Trägerstoffen zu gebräuchlichen Formulierungen verarbeitet, z. B. zu Emulsionskonzentraten oder Suspensionspulvern, bei denen der Wirkstoffgehalt zwischen 10 und 95 Gewichtsprozent liegt und die für die Ausbringung mit Wasser bis zur gewünschten Wirkstoffkonzentration verdünnt werden. Jedoch können auch unverdünnt anwendbare Präparate in Form von Stäuben und Granulaten hergestellt werden. Bei diesen Mitteln liegt der Wirkstoffgehalt zwischen 0,1 und 10 Gewichtsprozent, vorzugsweise zwischen 0,3 und 3 Gewichtsprozent.

Als Trägerstoffe kommen beispielsweise Kaolin, Talkum, Kreide, Aluminiumsilikate, Getreidemehl, Cellulosepulver, Holzmehl u. a. in Frage. Als Dispergatoren finden Kondensationsprodukte des Naphthalins bzw. der Naphthalinsulfonsäuren mit Phenol und Formaldehyd, Salze der Ligninsulfonsäure, Salze sulfatierter Hexa-, Hepta-, Octadecanole u. a. Verwendung. Silicone empfehlen sich als Antischaummittel. Als Lösungsmittel lassen sich Wasser, Alkohole, aromatische Kohlenwasserstoffe, Dimethylsulfoxid, Mineralöle und Pflanzenöle verwenden.

#### Formulierungsbeispiele (Angabe der Zusammensetzung in Gewichtsprozent)

##### 1) Emulsionskonzentrat

10%	einer Verbindung der Formel I
40%	Pflanzenöl
10%	Nonylphenolpolyglykolether
40%	Cyclohexanon

##### 2) Suspensionspulver

25%	einer Verbindung der Formel I
55%	Kaolin
10%	kolloidale Kieselsäure
9%	Calciumligninsulfonat
1%	Natriumtetrapropylbenzolsulfonat

##### 3) Suspensionspulver

95%	einer Verbindung der Formel I
4%	Calciumligninsulfonat
1%	Natriumtetrapropylbenzolsulfonat

##### 4) Stäubemittel

0,3%	einer Verbindung der Formel I
1,0%	Methylcellulose
98,7%	Talkum

Aus den Konzentraten 1 bis 3 werden durch Vermischen mit Wasser Spritzbrühen hergestellt, die im allgemeinen zwischen 0,005 und 0,5% Wirkstoff enthalten.

Überraschenderweise zeigen die erfindungsgemäßen Verbindungen ein äußerst günstiges Mikrobizid-Spektrum gegen phytopathogene Pilze und Bakterien. Sie besitzen kurative, präventive und systemische Eigenschaften und lassen sich zum Schutz von Kulturpflanzen einsetzen.

Erfindungsgemäße Wirkstoffe lassen sich besonders vorteilhaft gegen folgende Klassen phytopathogener Pilze einsetzen: Ascomyceten, Basidiomyceten, Fungi imperfecti und Phytomyceten.

Folgende Pflanzenarten kommen als behandelungsfähig in Betracht: Getreide, Kern-, Stein- und Beerenobst, Hülsenfrüchte, Ölkulturen, Gurkengewächse, Fasergewächse, Citrusfrüchte, Gemüsearten, Lorbeergewächse, Mais, Tabak, Nüsse, Kaffee, Zuckerrohr, Tee, Weinreben, Hopfen, Bananen und Naturkautschukgewächse sowie Compositen.

Wirkstoffe der allgemeinen Formel I können gleichzeitig oder nacheinander mit weiteren Wirkstoffen auf die zu behandelnde Fläche oder an die Pflanze gegeben werden, wobei diese weiteren Wirkstoffe Präparate, die das Pflanzenwachstum beeinflussen oder Pflanzenschutzmittel sein können.

Für die Anwendung werden die erfindungsgemäßen Verbindungen, gewünschtenfalls auch die Salze, in üblicher Weise mit Hilfs- und/oder Trägerstoffen zu gebräuchlichen Formen von Schädlingsbekämpfungsmitteln verarbeitet, z. B. zu Lösungen, Lösungs- bzw. Emulsionskonzentraten, Suspensionspulvern, Stäuben, Emulsionen. Die Konzentrate werden vor der Anwendung gegebenenfalls mit Wasser verdünnt, so daß Spritzbrühen mit einem Wirkstoffgehalt zwischen etwa 0,005 und 1 Gewichtsprozent erhalten werden. Bei der Anwendung als Low-Volume- oder Ultra-Low-Volume-Formulierung kann der Wirkstoffgehalt auch erheblich höher sein (bis 20 bzw. 50 Gewichtsprozent). Bevorzugte Applikationsformen sind die Blattapplikation, Bodenapplikation und das Coating der Samenkörner.

Beispiele für erfindungsgemäße Formulierungen:

##### 1. Suspensionspulver

20 Gew.-Teile	einer Verbindung nach Formel I
20 Gew.-Teile	Kaolin
5 Gew.-Teile	Natriumsulfat
2 Gew.-Teile	Schlämmerde

# OS 37 17 480

1 Gew.-Teile Diisobutyl-naphthalin-natriumsulfonat (Netzmittel)  
43 Gew.-Teile Kieselkreide

Die Bestandteile werden vermahlen und das Mittel wird für die Anwendung in so viel Wasser suspendiert, daß die Wirkstoffkonzentration etwa 0,005 bis 0,5 Gewichtsprozent beträgt.

## 2. Emulsionskonzentrat

15 Gew.-Teile einer Verbindung nach Formel I  
10 Gew.-Teile Dodecylbenzolsulfonsäure-triäthylaminsalz  
75 Gew.-Teile Dimethylformamid

Die Herstellung der Verbindung der Formel I wird anschließend näher erläutert. Entsprechend dem gegebenen Beispiel können die in Tabelle 1 aufgeführten Pyrimidine der Formel (I) erhalten werden.

## Beispiel 1

### 2-Amino-4-chlor-6-(p-chlorbenzyl)aminopyrimidin MGL 1949

65 g 2-Amino-4,6-dichlorpyrimidin werden zusammen mit 84 ml Triethylamin und 85 g 4-Chlorbenzylamin in 600 ml Ethanol 12 Stunden zum Sieden erhitzt. Nach Abdestillieren des Lösungsmittels wird mit 700 ml Wasser verrieben, der Rückstand abgesaugt und aus Toluol umkristallisiert.

Ausbeute: 67 g (62,2%) 2-Amino-4-chlor-6-(p-chlorbenzyl)-aminopyrimidin als Kristallpulver vom Schmp. 162° C.

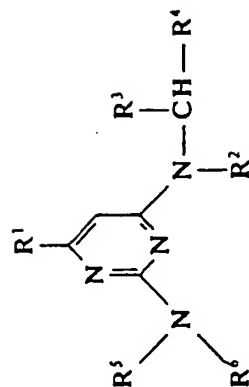
#### Elementaranalyse:

Ber. C: 49,10% H: 3,75% N: 20,81%

Gef. C: 48,75% H: 3,67% N: 20,70%

Die in Tabelle 1 aufgeführten Verbindungen können analog dargestellt werden.

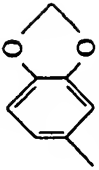
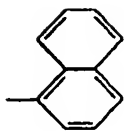
Tabelle I

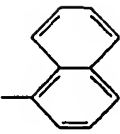
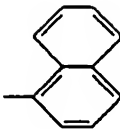
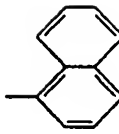
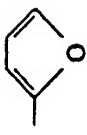


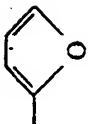
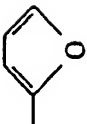

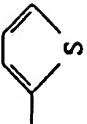
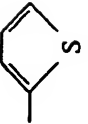
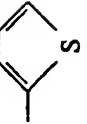
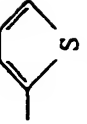
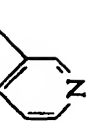
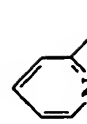

in- Nr.	R <sup>1</sup>	R <sup>2</sup>	R <sup>3</sup>	R <sup>4</sup>	R <sup>5</sup>	R <sup>6</sup>	physikalische Daten
	O—CH <sub>3</sub>	H	H	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	H	H	Fp: 124°C
	O—CH <sub>3</sub>	H	H	CH <sub>2</sub> —C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	H	CH <sub>3</sub>	
	Cl	H	H	2-Cl—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	H	Fp: 165°C
	Cl	H	H	3-Cl—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	H	Fp: 161°C
	CF <sub>3</sub>	H	H	3-Cl—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	H	
	O—CH <sub>3</sub>	H	H	3-Cl—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	H	
	O—CF <sub>3</sub>	H	H	3-Cl—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	H	
	F	H	H	3-Cl—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	H	
	Cl	H	H	4-Cl—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	H	Fp: 162°C
	CF <sub>3</sub>	H	H	4-Cl—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	H	
	O—CH <sub>3</sub>	H	H	4-Cl—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	H	
	O—CF <sub>3</sub>	H	H	4-Cl—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	H	
	F	H	H	4-Cl—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	H	
	Cl	H	H	4-F—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	H	Fp: 126°C
	CH <sub>3</sub>	H	H	4-Cl—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	H	
	CH <sub>3</sub>	H	H	4-F—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	H	
	CH <sub>3</sub>	H	H	3-Cl—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	H	

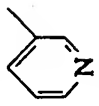
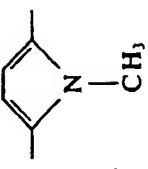



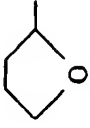
bin- g Nr.	R <sup>1</sup>	R <sup>2</sup>	R <sup>3</sup>	R <sup>4</sup>	R <sup>5</sup>	R <sup>6</sup>	physikalische Daten
	Cl	H	H	4-Br—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	H	Fp: 186°C
	Cl	H	H	2,4-Cl <sub>2</sub> —C <sub>6</sub> H <sub>3</sub>	H	H	Fp: 205°C
	O—CH <sub>3</sub>	H	H	2,4-Cl <sub>2</sub> —C <sub>6</sub> H <sub>3</sub>	H	H	
	CF <sub>3</sub>	H	H	2,4-Cl <sub>2</sub> —C <sub>6</sub> H <sub>3</sub>	H	H	
	Cl	H	H	3,4-Cl <sub>2</sub> —C <sub>6</sub> H <sub>3</sub>	H	H	Fp: 159°C
	O—CH <sub>3</sub>	H	H	3,4-Cl <sub>2</sub> —C <sub>6</sub> H <sub>3</sub>	H	H	
	CF <sub>3</sub>	H	H	3,4-Cl <sub>2</sub> —C <sub>6</sub> H <sub>3</sub>	H	H	
	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	CH <sub>3</sub>	H	3-(CH <sub>3</sub> —O)—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	
	Cl	H	H	3-(CH <sub>3</sub> —O)—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	H	Fp: 139°C
	O—CF <sub>3</sub>	H	H	3-(CH <sub>3</sub> —O)—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	H	
	Cl	H	H	CH <sub>3</sub> —[4-(CH <sub>3</sub> O)—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> ]	H	H	Fp: 111°C
	Cl	H	H	4-(CH <sub>3</sub> —O)—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	H	Fp: 146°C
	Cl	H	H	4-Cl—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	CH <sub>3</sub> (CH <sub>3</sub> ) <sub>11</sub>	H	Fp: 53°C
	Cl	H	H	3-Cl—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	CH <sub>3</sub> (CH <sub>3</sub> ) <sub>11</sub>	H	Öl
	Cl	H	H	4-Cl—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> C—CH <sub>3</sub>	H	
	Cl	H	H	3-Cl—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> C—CH <sub>3</sub>	H	
	Cl	H	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	H	H	Fp: 147°C
	Cl	H	H	3-CH <sub>3</sub> —C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	H	Fp: 100°C
	O—CF <sub>3</sub>	H	H	3-CH <sub>3</sub> —C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	H	
	Cl	H	H	4-CH <sub>3</sub> —C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	H	Fp: 174°C
	O—CF <sub>3</sub>	H	H	4-CF <sub>3</sub> —C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	H	
	CH <sub>3</sub>	H	H	4-CF <sub>3</sub> —C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	H	
	Cl	H	H	4-CF <sub>3</sub> —C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	H	Fp: 160°C
	CF <sub>3</sub>	H	H	4-[(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> Cl]—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	H	
	Cl	H	H	4-[(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> Cl]—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	H	Fp: 132°C

Ein- & Nr.	R <sup>1</sup>	R <sup>2</sup>	R <sup>3</sup>	R <sup>4</sup>	R <sup>5</sup>	R <sup>6</sup>	physikalische Daten
	CF <sub>3</sub>	H	H	3,5-(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> -C <sub>6</sub> H <sub>3</sub>	H	H	Fp: 132°C
	Cl	H	H	3,5-(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> -C <sub>6</sub> H <sub>3</sub>	H	H	
	Cl	H	H	4-Cl-C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>		-(CH <sub>3</sub> ) <sub>4</sub> -	
	Cl	H	H	3-Cl-C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>		-(CH <sub>3</sub> ) <sub>4</sub> -	
	O-CF <sub>3</sub>	H	H	4-Cl-C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>		-(CH <sub>3</sub> ) <sub>4</sub> -	
	Cl	H	H	3-Cl-C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>		-(CH <sub>3</sub> ) <sub>5</sub> -	
	Cl	H	H	4-Cl-C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>		-(CH <sub>3</sub> ) <sub>5</sub> -	
	Cl	H	H		H	H	Fp: 168°C
	O-CF <sub>3</sub>	H	H	3,5-(CF <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> -C <sub>6</sub> H <sub>3</sub>	H	H	
	CF <sub>3</sub>	H	H	3,5-(CF <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> -C <sub>6</sub> H <sub>3</sub>	H	H	Fp: 135°C
	Cl	H	H	3,5-(CF <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> -C <sub>6</sub> H <sub>3</sub>	H	H	Fp: 203°C
	Cl	H	H	3,5-(CF <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> -C <sub>6</sub> H <sub>3</sub>	H	H	Fp: 115°C
	Cl	H	H	3,4,5-(CH <sub>3</sub> O) <sub>3</sub> -C <sub>6</sub> H <sub>2</sub>	H	H	Fp: 160°C
	Cl	H	H	3-(C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> O)-C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	H	Fp: 89°C
	Cl	H	H	CH <sub>3</sub> -[4-(OH)-C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> ]	H	H	Fp: 138°C
	Cl	H	H	(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> -C <sub>6</sub> H <sub>3</sub>	H	H	Fp: 120°C
	Cl	H	H	CH <sub>3</sub> -[2-Cl-C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> ]	H	H	Fp: 117°C
	Cl	H	H	CH <sub>3</sub> -[3-CF <sub>3</sub> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> ]	H	H	
	Cl	H	H	CH(CH <sub>3</sub> )C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	H	H	
	Cl	H	H		H	H	Fp: 189°C

Verbin- ung Nr.	R <sup>1</sup>	R <sup>2</sup>	R <sup>3</sup>	R <sup>4</sup>	R <sup>5</sup>	R <sup>6</sup>	physikalische Daten
2	CF <sub>3</sub>	H	H		CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	Fp: 199°C
3	Cl	H	CH <sub>3</sub>	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	H	H	Öl
4	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> —C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	H	H	Fp: 112°C
5	CF <sub>3</sub>	H	CH <sub>3</sub>	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	
6	CF <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	H	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	
7	CF <sub>3</sub>	H	H	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	H	H	Fp: 134°C
8	Cl	H	CH <sub>2</sub> C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	H	H	Öl
9	Cl	CH(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	H	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	H	H	Fp: 132°C
0	Cl	H	H	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	
1	CF <sub>3</sub>	H	H	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	H	
2	Cl	H	H	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	H	Fp: 89°C
3	Cl	H	H	4-CH <sub>3</sub> O—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	H	Fp: 112°C
4	CF <sub>3</sub>	H	H		H	H	Fp: 199°C
5	Cl	H	H		C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	H	Fp: 123°C
6	CF <sub>3</sub>	H	H		H	H	

Ein- g. Nr.	R <sup>1</sup>	R <sup>2</sup>	R <sup>3</sup>	R <sup>4</sup>	R <sup>5</sup>	R <sup>6</sup>	physikalische Daten
	O—CH <sub>3</sub>	H	H		H	H	
	Cl	H	H		H	H	Fp: 142°C
	CH <sub>3</sub>	H	H		H	H	
	CF <sub>3</sub>	H	H		H	H	
	CCl <sub>3</sub>	H	H		H	H	
	Cl	H	H		H	H	Fp: 111°C
	O—CF <sub>3</sub>	H	H		H	H	
	O—CH <sub>3</sub>	H	H		H	H	
	Cl	H	H		H	H	Fp: 180°C
	Cl	H	H		H	H	Fp: 199°C

Verbin- ding Nr.	R <sup>1</sup>	R <sup>2</sup>	R <sup>3</sup>	R <sup>4</sup>	R <sup>5</sup>	R <sup>6</sup>	physikalische Daten
87	Cl	H	H		H	H	Fp: 207°C
88	Cl	H	CH <sub>3</sub>	(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> —C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	H	H	Öl
89	Cl	H	H		H	H	
90	Cl	H	H	4(CF <sub>3</sub> O)—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	H	Fp: 137°C
91	Cl	H	H	(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> —C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	H	H	Fp: 84°C
92	Cl	H	H	3-Cl—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	CHO	
93	CF <sub>3</sub>	H	H	3-Cl—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	CHO	
94	OCF <sub>3</sub>	H	H	3-Cl—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	CHO	
95	Cl	H	H	3-Cl—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	CH <sub>3</sub>	CHO	
96	Cl	H	H	4-Cl—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	CHO	
97	Cl	H	H	3-Cl—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	CH <sub>3</sub> CO	
98	Cl	H	H	4-Cl—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	CH <sub>3</sub> CO	
99	Cl	H	H	4-(H <sub>2</sub> NSO <sub>2</sub> )C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	H	Fp: 198°C
00	CF <sub>3</sub>	H	H	4-(H <sub>2</sub> NSO <sub>2</sub> )C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> CO	
01	Cl	H	H	3-(NO <sub>2</sub> )—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	H	Fp: 164°C
02	Cl	H	H	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	H	H	Fp: 134°C
03	Cl	H	H	4 ClC <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	H	Fp: 89°C
04	Cl	H	H	CH(OH)—C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	H	H	Fp: 159°C

Ein- g Nr.	R <sup>1</sup>	R <sup>2</sup>	R <sup>3</sup>	R <sup>4</sup>	R <sup>5</sup>	R <sup>6</sup>	physikalische Daten
5	Cl	H		4-CH <sub>3</sub> O—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	H	Öl
6	Cl	H	H	Cyclohexyl	H	H	Fp: 116°C
7	Cl	H	H	3-CF—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	H	Fp: 86°C
8	Cl	H	CH <sub>3</sub>	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	H	Fp: 107°C
9	Cl	H	H	4-CF <sub>3</sub> O—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	H	Fp: 78°C
10	Cl	H	H		H	H	Fp: 146°C
11	Cl	H	H	4-Cl—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	n-C <sub>4</sub> H <sub>9</sub>	H	Fp: 71°C
12	Cl	H	H	CH <sub>3</sub> [4(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> NCO—O—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> ]	H	H	Fp: 217°C
13	Cl	H	H	4-CF <sub>3</sub> HO—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	H	Fp: 90°C
14	Cl	H	H	4-Cl—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	CH <sub>2</sub> =CHCH <sub>3</sub>	H	Fp: 75°C
15	Cl	H	H	4-(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> N—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	H	Fp: 163°C
16	Cl	H	H	4-CH <sub>3</sub> S—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	H	Fp: 121°C
17	Cl	H	H	4-CN—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	H	Fp: 63°C
18	Cl	H	H	4-CH <sub>3</sub> SO <sub>2</sub> —C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	H	Fp: 176°C
19	Cl	H	H	4-Cl—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CH	H	Öl
20	Cl	H	H	3-Cl—4-CH <sub>3</sub> —C <sub>6</sub> H <sub>3</sub>	H	H	Fp: 143°C
21	Cl	H	CH <sub>3</sub>	4-Cl—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	

Verbin- ung Nr.	R <sup>1</sup>	R <sup>2</sup>	R <sup>3</sup>	R <sup>4</sup>	R <sup>5</sup>	R <sup>6</sup>	physikalische Daten
22	Cl	H	H	3,4-(OCH <sub>3</sub> )C <sub>6</sub> H <sub>3</sub>	H	H	Fp: 181°C
23	Cl	H	H	4-(C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> )—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	H	Fp: 177°C
24	Cl	H	H	4-(OH)—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	H	Fp: 164°C
25	Cl	H	H	3,5-(Cl) <sub>2</sub> —C <sub>6</sub> H <sub>3</sub>	H	H	Fp: 139°C
26	Cl	H	H	4-(NH <sub>2</sub> )—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	H	Fp: 142°C
27	Cl	H	H	4-(CH <sub>3</sub> COO)—C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	H	H	Fp: 176°C
28	Cl	H	H	3-(Cl)-4(F)—C <sub>6</sub> H <sub>3</sub>	H	H	Fp: 171°C